Kineziologija, Vol. 15 (1983.) str. 9—15

VLADIMIR IVANČEVIĆ I BRANISLAV MILIŠIĆ,
Zavod za fizičku kulturu u Beogradu
SLOBODAN JARIĆ
Fakultet za fizičku kulturu u Beogradu
PREDRAG GAVRILOVIĆ
Zavod za fizičku kulturu u Beogradu

Primljeno 11. 5. 1983.

KVANTNOMEHANIČKI MODEL MIŠIĆNE KONTRAKCIJE

SAŽETAK

Rad predstavlja pokušaj kvantnomehaničkog modeliranja procesa mišićne kontrakcije na molekularnom nivou. Primenjeni formalizam treba da omogući sintezu postojećih teorija mišićne kontrakcije. Prvo je izložen osnovni model Schrödingerove jednačine kontraktilnog procesa za nepertubovano stanje istraživanog mikrosistema, zatim su uključene perturbacije potencijalne prirode iz spoljašnjeg elektrostatičkog polja aktuelne miofibrile, a na kraju su analizirane energetske transformacije i određeni kriterijumi za efikasnost mišićnog rada na kvantnomehaničkom nivou.

1. UVOD — MESTO KVANTNE MEHANIKE U POSTOJEĆOJ TEORIJI MIŠIĆNE KONTRAKCIJE

Teorija klizećih filamenata aktinskih i miozinskih proteina danas je opšte prihvaćena kao strukturalna osnova mehanizma mišićne kontrakcije. Ona generiše hipotezu da mišićna tenzija i sposobnost skraćivanja zavise od parcijalnog preklapanja aktinskih (tankih) i miozinskih (debelih) niti. Nastanak ove teorije vezuje se za eksperimentalne radove A. F. Huxleya (1954), H. E. Huxleya (1954), Podolskya (1959), Jewella i Willkiea (1960) — da pomenemo samo najveće autoritete na ovom istraživačkom polju. Iz ovih radova potiče i poznata veza između tenzije mišića i njegove dužine (length-tension relation). Na osnovu tih mišićnih karakteristika izveden je značajan zaključak da je generisanje sile proporcionalno maksimalnom preklapanju aktinskih i miozinskih niti, što znači da se mišićna sila generiše upravo u regionu filamentarnog preklapanja.

Brojna ispitivanja fizičkih i hemijskih karakteristika aktina i miozina indiciraju da se interakcija ovih proteinskih filamenata odvija simultano sa raspadanjem prisutnog ATP-a, odakle je izveden zaključak o fundamentalnoj ulozi ATP-a u samom procesu kontrakcije. Na nesreću, malo je poznata sama struktura aktina i miozina, da bi se moglo egzaktno utvrditi mehanizam njihove kontrakcije. Teorije koje su do današnjeg dana objašnjavale ovaj fenomen mogu se svrstati u dve osnovne grupe:

— teorije poprečnih mostića, A. F. Huxleya (1957, 1964) i H. E. Huxleya (1960, 1971),
— elektrostatičke teorije, Elliotta (1968) i Sheara (1970).

Teorija poprečnih mostića (projekcija) pretpostavlja da tenziju ili međusobno kretanje filamenata prouzrokuje serija projekcija distribuiranih duž miozinskih niti, koje interaktuju na odgovarajućim mestima sa aktinskim nitima. Osnovna mišićna jedinica je polovina sarkomere sa mostićima, koji deluju poprečno na uzdužnu osu sarkomere, a međusobno paralelno. Da bi došlo do mišićnog skraćenja, miozinski mostići moraju sekvencijalno da hvataju i otpuštaju (interaktuju) mesto na tankim filamentima, dok ovi prolaze pored njih. Pretpostavlja se da mostići deluju nezavisno jedan na drugog i da se svaki ciklus hvatanja i otpuštanja jednog mostića odvija uz hidrolizu jednog molekula ATP-a. Dakle, teorija poprečnih mostića mehanizam mišićne kontrakcije objašnjava kroz mehaniku sumarnih interakcija miozinskih projekcija, pri čemu energiju za vršenje rada daje hidroliza ATP-a. Ovo je danas dominantna miofiziološka teorija na molekularnom nivou, ali ona ne objašnjava određene efekte na makronivou, kao što je, naprim., pojava elektromiografskih talasa. Na ovo pitanje odgovor daju elektrostatičke teorije.

Prema elektrostatičkim teorijama pokretačka sila za kontrakciju sarkomere je proizvod tendencije filamentarne rešetke da zadrži konstantnu zapreminu uprkos njenom transverzalnom širenju koje je elektrostatičke prirode. Kada bioelektrični impuls donese na filamente određenu količinu naelektrisanja, onda se ovi međusobno odbijaju i šire u stranu, pa sarkomera mora da se skraćuje kako bi održala konstantnu zapreminu. Nekakve filamentarne (miozinske) projekcije mogu se uključiti u ovaj koncept i to u funkciji transporta naelektrisanja u blizinu tankih filamenata kako bi se isključiti efekti »ekrana« kontrajona koji bi se pojavili ako bi površi filamenata bile suviše razdvojene. Uloga ATP-a leži u produkciji neophodnog repulzivnog naelektrisanja. Prema tome, ova teorija se bazira na pretvaranju biohemijske energije u električnu, pri čemu dolazi do geometrijske deformacije sarkomere (a sumarno i celog mišića) usled elektrostatičkih zakona.

Sa radovima Ebashia i Endoa (1968), Podolskya (1968) i Juliana (1971) razjašnjena je i uloga kalcijuma (jona Ca^{++} u kontraktilnom procesu. Smatra se da ponašanje kalcijuma zavisi od prisustva proteina pridružena aktinskom filamentu: troponin i tropomiozin. Kada količina sarkoplazmatičnog Ca^{++} opadne na $10^{-7}M$ (u relaksiranom mišiću), molekuli troponina šalju inhibitorne uticaje na susedne aktinske molekule, koji sprečavaju aktiviranje miozinskog fermenta ATP-aze i kontaktiranje poprečnih mostića. Kada se količina sarkoplazmatičnog Ca^{++}

podigne iznad »praga«, molekuli troponina oduzimaju višak kalcijuma (dva do tri jona Ca^{++} po molekulu), a na taj način se isključuju inhibitorni uticaji troponina na aktin. Dakle, količina prisutnih jona Ca^{++} predstavlja kontrolni element u biofeedbacku mišićne kontrakcije. Međutim, sam mehanizam variranja kalcijuma u sarkoplazmi do danas nije eksplicitno objašnjen.

Na osnovu ovog kratkog pregleda dosadašnjih istraživanja mišićne kontrakcije na molekularnom nivou možemo zaključiti da je skraćenje sarkomere, odnosno interfilamentarno kretanje u njoj, rezultat elektromehaničkih impulsa koji poprečne mostiće na debelim filamentima predaju tankim filamentima, što opet prouzrokuje transverzalno širenje sarkomere, a u sumarnom efektu i celog mišića. Prema tome, istraživanje se treba koncentrisati na opšti uvid u to kako svaki od ovih pokretača pojedinačno radi. A pokretač je deo jednog molekula. Slično tome, u procesu kontrakcije mišića, određene pumpe transportuju jone Ca^{++} iz regiona niske u regione visoke koncentracije, suprotnim smerom od onog koji bi se mogao očekivati (sa stanovišta fenomenološke termodinamike) od čisto disipativnih procesa kakav je difuzija (a biokinetika sarkoplazmatičnog kalcijuma do danas se svodila isključivo na proces difuzije).

Rešenje ova dva problema ne možemo očekivati ni od klasične hemije, ni od klasične fizike. Na molekularnom nivou analize bioloških procesa danas esencijalnu ulogu ima savremeni kvantnomehanički pristup. Kvantnomehanička talasna funkcija je najprirodniji put za definisanje mehanike poprečnih mostića u elektrostatičkom polju mišićnog vlakna. Ona omogućava logičnu sintezu dveju postojećih teorija o procesu mišićne kontrakcije na molekularnom nivou. Samo kvantnomehanički zakoni transformacije energije u elektromehanički rad mogu dati objašnjenje o transportu Ca^{++} jona u procesu kontrakcije, a princip kvantovanja energije pruža prirodnu osnovu za biohemiju ATP-a.

Ovo su razlozi zbog kojih se, nakon primarnih istraživanja mišićne kontrakcije sa stanovišta klasične fizike (Ivančević, 1981), opredeljujemo za kvantnoteorijsku analizu ovog fundamentalnog kineziološkog procesa.

2. KVANTNOMEHANIČKI FORMALIZAM

Pre nego što pređemo na kvantnomehaničko modeliranje kontraktilnog procesa izložićemo u osnovnim crtama definicije, teoreme i aksiome korišćenog metoda.

— **Metrika** linearnog vektorskog prostora određena je skupom aksioma:

M_1 : $d(x,y) > 0 \quad x \neq y; \quad d(x,y) = 0 <=> x = y$
M_2 : $d(x,y) = d(y,x)$
M_3 : $d(x,y)$— ili $= d(x,z) + d(z,y)$

— **Norma** linearnog vektorskog prostora određena je skupom aksioma:

N_1 : $\|x\| >$ ili $= 0; \quad \|x\| = 0 <=> = 0$
N_2 : $\|\lambda x\| = |\lambda| \cdot \|x\|$
N_3 : $\|x+y\| <$ ili $= \|x+y\|$

— **Skalarni proizvod** u linearnom vektorskom prostoru nad poljem kompleksnih brojeva određen je skupom aksioma:

SP_1 : $(\lambda x,y) = \lambda(x,y)$
SP_2 : $(x_1+x_2,y) = (x_1,y) + (x_2,y)$
SP_3 : $(x,y) = (y,x)^*$
SP_4 : $(x,x) >$ ili $= 0$; $(x,x) = 0 <=> x = 0$

— **Labesqueov integral:** $\int_L f(x)dx$ ograničene i merljive funkcije $f(x)$, definisane nad ograničenim i merljivim skupom L, predstavlja zajedničku granicu suma:

$$s_n = \sum_{k=0}^{n} f_k(x) m(L_k) \qquad \text{i} \qquad S_n = \sum_{k=0}^{n} f_{k+1}(x) m(L_k)$$

kada $n \to \infty$ a max $(f_{k+1})x[-f_k(k)] \to 0$. Ovde je $m(L)$ — Lebesgueova mera skupa L, a k — broj subintervala skupa L.

— Linearni vektorski prostor je **metrički**, ako je u njemu definisana metrika.

— Linearni vektorski prostor je **normiran**, ako je u njemu definisana norma.

— Normirani metrički prostor je **kompaktan**, ako svaki njegov beskonačni podskup ima bar jednu tačku nagomilavanja.

— Normirani metrički prostor je **ermitski**, ako je u njemu definisan skalarni proizvod.

— Kompaktan ermitski prostor je **Hilbertov prostor.**

— Egzistencija Lebesgueovog integrala u Hilbertovim prostorima omogućuje analizu diskontinualnih fizičkih procesa, procesa kvantnomehaničke prirode.

Dok je u klasičnoj mehanici stanje fizičkog sistema u proizvoljnom trenutku determinisano vrednostima generalisanih kordinata i njihovih brzina, u kvantnoj mehanici taj opis nosi probabilistički karakter. Ovde je stanje fizičkog sistema poznato ako je data neka kompleksna funkcija $\Psi(\xi,t)$, koja zavisi od n generalisanih koordinata $(\xi_1,\xi_2,\ldots,\xi_n) = \{\xi_i\}_1^n$ i vremena t koje se uzima kao parametar. Ona se naziva **talasnom funkcijom** aktuelnog fizičkog sistema, odnosno njegovom amplitudom verovatnoće, pošto određuje gustinu raspodele dinamičkih promenljivih $\{\xi_i\}_1^n$: $(\xi,t) = |\Psi(\xi,t)|^2$.

Totalna verovatnoća konvencionalno se normira na jedinicu:

$$\|\Psi\|^2 = \int_{L_2} |\Psi(\xi,t)|^2 d\xi = 1.$$

Dakle, talasna funkcija mora biti kvadratno Lebesgue-integrabilna. Skup svih kvadratno integrabilnih kompleksnih funkcija predstavlja **dvodimenzionalni linearni Hilbertov prostor L_2.**

Prema tome, kvantna mehanika postulira da svakom objektivnom stanju određenog fizičkog sistema odgovara neki element (vektor) Hilbertovog prostora L_2. U ovom prostoru skalarni proizvod definiše se relacijom:

$$<\Psi_1|\Psi_2> = \int_{L_2} \Psi_1^*(\xi,t)\, \Psi_2(\xi,t)\, d\xi$$

i zadovoljava sve aksiome skalarnog proizvoda.

Kvantnomehanički formalizam se bazira na sledećim principima:

P_1: Svakoj fizičkoj veličini F odgovara neki linearni hermitski operator F koji deluje u prstoru L_2, i

P_2: Fizička veličina F u proizvoljnom kvantnomehaničkom stanju može uzimati samo one vrednosti koje odgovaraju spektru njenog operatora F.

P_3: Srednja vrednost fizičke veličine F u proizvoljnom stanju (ξ, t) određena je relacijom:

$$F = \frac{<\Psi|F|\Psi>}{<\Psi|\Psi>}.$$

Operator F je linearan ako je zadovoljena relacija:

$$F(\sum_{i=1}^{k} a_i \Psi_i) = \sum_{i=1}^{k} a_i F \Psi_i ,$$

gde su $\{\Psi_i\}^k_1$ proizvoljni vektori iz L_2, a $\{\alpha_i\}^k_1$ proizvoljne kompleksne konstante.

Operator F+ je **hermitski konjugovan** u odnosu na operator F, ako je ispunjena jednakost:

$$<\Psi_1|F|\Psi_2> = <\Psi_2|F+|\Psi_1>^*,$$

gde su Ψ_1 i Ψ_2 proizvoljni vektori iz L_2.

Operator F je **hermitski** ili **autokonjugovan** ako je u L_2 ispunjena relacija:

$$F = F^+, \text{ odnosno, } <\Psi_1|F|\Psi_2> = <\Psi_2|F|\Psi_1>^*.$$

Broj F se naziva **svojstvenom vrednošću** operatora F, ako za $\Psi \neq O$ u L_2 važi relacija: $F\Psi = F\Psi$.

Tada se funkcija Ψ naziva **svojstvena funkcija operatotora F** koja odgovara svojstvenoj vrednosti F. Skup svih svojstvenih vrednosti nekog operatora obrazuje **njegov spektar.**

Operator FG predstavlja proizvod operatora F i G i on je u opštem slučaju različit od operatora GF.

Operator F, G = FG — GF naziva se komutatorom operatora F i G. Ako je F, G = O, operatori F i G komutiraju.

Osnovni operatori u kvantnoj mehanici su **operatori energije.** Operator kinetičke energije čestice mase m određen je relacijom:

$$T = -\frac{h^2}{2m}\nabla^2 = -\frac{h^2}{2m}\left(\frac{\alpha^2}{\delta x^2} + \frac{\alpha^2}{\delta y^2} + \frac{\alpha^2}{\delta z^2}\right),$$

gde je h **Plankova konstanta h** podeljena sa 2π, (h = 1,054 X 10^{-27}ergsec), . dok je operator potencijalne energije u opštem slučaju neka funkcija položaja posmatranog mikrosistema i vremena:

$$U = U(x, y, z, t) = U(\vec{r}, t).$$

Na osnovu dve poslednje relacije za operatora totalne energije mikrosistema u potencijalnom polju dobijamo:

$$H = T + U = -\frac{h^2}{2m}\nabla^2 + U(\vec{r}, t).$$

Ovo je osnovni operator u kvantnoj mehanici, a naziva se **Hamiltonov operator** ili **Hamiltonijan.**

Fundamentalni problem kvantne mehanike predstavlja **svojstveni problem Hamiltonovog operatora** posmatranog mikrosistema, a definisan je **Shrödingerovom jednačinom:** $\Psi H = E\Psi$.

Dakle, energija datog mikrosistema je u stvari svojstvena vrednost Hamiltonovog operatora, a talasna funkcija tog sistema je svojstvena funkcija Hamiltonijana sistema.

3. Shrödingerova jednačina mišićne kontrakcije u aksijalnosimetričnom elektrostatičkom polju mišićnog vlakna

Proces mišićne kontrakcije na molekularnom nivou se manifestuje skraćivanjem osnovne muskularne jedinice — sarkomere, odnosno, kretanjem miozinskih filamenata u odnosu na aktinske. Imamo, dakle, pred sobom jednu mehaničku pojavu koja se odvija u elektrostatičkom potencijalnom polju mišićnog vlakna koje okružuje sarkomeru. Pojavu koja se odvija pod dejstvom biohemijske energije i kontrolom kinetičkog mehanizma jona Ca++. Pojavu, koja ima probabilistički karakter.

Kvantnomehaničkim formalizmom ovakve pojave se opisuju talasnom funkcijom u Hilbertovom kompleksnom prostoru. A talasna funkcija predstavlja rešenje Schrödingerove jednačine, odnosno rešenje svojstvenog problema Hamiltonijana datog procesa.

Opšti oblik Schrödingerove jednačine je sledeći:

$$ih \frac{\alpha \Psi(\xi^i, t)}{\alpha t} = H \Psi(\xi^i, t). \tag{1}$$

Ako pak smatramo da se kontraktilni proces vrši u vremenski nezavisnom potencijalnom polju: $U = U(\vec{r})$, onda je Hamiltonijan sistema određen sa:

$$H = -\frac{h^2}{2m}\nabla^2 + U(\vec{r}), \tag{2}$$

pa dobijamo stacionarni oblik Schrödingerove jednačine:

$$\nabla^2\Psi + \frac{2m}{h^2}(E—U(r)) = 0, \tag{3}$$

gde je $\Psi = \Psi(\xi^i)_i^n$ — stacionarna talasna funkcija.

Modeliranje kontraktilnog procesa može se formulisati kao prvi konturni problem za stacionarnu Schrödingerovu jednačinu unutar cilindričnog polja sarkomere ograničenog sa: $\rho < a$, $O < z < l$, ako je

$$\Psi|_{\rho=a} = O; \quad \Psi|_{z=o} = f(\rho, \varphi); \quad \Psi|_{z=l} = F(\rho, \varphi).$$

Da bismo ovu jednačinu izrazili u polarno-cilindarskom koordinatnom sistemu, poći ćemo od njenog tenzorskog oblika:

$$\frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\alpha}{\alpha \xi^i} (\sqrt{g}\, g^{ij} \frac{\alpha \Psi}{\alpha \xi^j}) + \frac{2m}{h2}(E\text{-}U(\xi^i))\Psi = O, \tag{5}$$

gde je g_{ij} — metrički tenzor sarkomere.

U polarno-eilindarskim koordinatama: $\xi^1 = \rho$, $\xi^2 = \varphi$, $\xi^3 = z$, dobijamo:

$$\{g_{ij}\} = \begin{Bmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & \rho^2 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{Bmatrix},\ \{g^{ij}\} = \begin{Bmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1/\rho^2 & 1\\ 0 & 0 & 1\end{Bmatrix},$$

$$\sqrt{g} = \rho, \qquad (6)$$

pa Schrödingerova jednačina postaje:

$$\frac{1}{\alpha}\Big(\frac{\alpha}{\alpha\delta}\big(\delta g\,\frac{\delta\delta\,\alpha\Psi}{\alpha\delta}\big) + \frac{\alpha}{\alpha\varphi}\big(\delta g\,\frac{\varphi\varphi\,\alpha\Psi}{\alpha\varphi}\big) + \frac{\alpha}{\alpha z}$$

$$\big(g\,\frac{zz\,\alpha\Psi}{\alpha z}\big)\Big) + \frac{2m}{h2}(E-U)\Psi = O, \qquad (7)$$

odnosno, u konačnom obliku:

$$\frac{1}{\rho}\frac{\alpha}{\alpha\rho}\big(\rho\frac{\alpha\Psi}{\alpha\rho}\big) + \frac{1\,\alpha^2\Psi}{o^2\alpha\Psi^2} + \frac{\alpha^2\Psi}{\alpha z^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\Psi = 0. \qquad (8)$$

Ovu jednačinu moguće je rešiti samo za konstantnu vrednost potencijalne energije elektrostatičkog polja miofibrile, što ćemo mi u prvom slučaju i pretpostaviti.

Dati konturni problem rešićemo Fourierovim metodom razdvajanja promenljivih. Talasnu funkciju našeg kontraktilnog procesa izrazićemo u obliku proizvoda:

$$\Psi(\rho, \varphi, z) = V(\rho, \varphi)Z(z). \qquad (9)$$

Zamenom u (8) i razdvajanjem promenljivih, dobijamo za $V(\rho, \varphi)$ jednačinu:

$$\frac{1}{\rho}\frac{\alpha}{\alpha\rho}\big(\rho\frac{\alpha v}{\alpha\rho}\big) + \frac{1\,\alpha^2 v}{\rho^2\alpha\varphi^2} + \lambda V = -\frac{2m}{\hbar^2}(E-U), \qquad (10)$$

sa konturnim uslovom: $V(a, \varphi) = O$, (11)

a za $Z(z)$ jednačinu $Z'' - k^2Z = 0$. (12)

Stavljajući dalje: $V(\rho, \varphi) = R(\rho)\,\Phi(\varphi)$, (13)

dobijamo konačno:

$$\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\big(\rho\frac{dR}{d\rho}\big) + \big(\lambda - \frac{n^2}{\rho^2}\big)R = 0 \qquad (14)$$

$$\text{i } \Phi'' + n^2\Phi = O \qquad (15)$$

gde je n — konstanta razdvajanja promenljivih, a

$$\lambda = k^2 + \frac{2m}{h^2}(E-U) \qquad (16)$$

Relacija (14) je radijalna Schrödingerova jednačina mišićne kontrakcije iz koje se dobija funkcija $R(\rho)$ uz granični uslov: $R(a) = O$ (17)

i prirodno ograničenje: $|R(O)| < \infty$. (18)

Ona se u matematici naziva Besselovom jednačinom a rešenja su joj Besseove funkcije: J_n:
$R(\rho) = J_n(\sqrt{\lambda}\rho)$. (19)

Granični uslov uz $\rho = a$ daje:
$J_n(\mu) = O$, gde je $\mu = \sqrt{\lambda}\,a$. (20)

Sa $\mu^{(u)}_1, \mu^{(u)}_2, \ldots, \mu^{(u)}_m$ označićemo korene te jednačine. Na taj način naš kontraktilni konturni problem ima svojstvene vrednosti $\lambda_{mn} = \big(\frac{\mu^{(u)}_m}{a}\big)^2$, kojima odgovaraju svojstvene funkcije:

$$V_{n,m} = J_n\big(\frac{\mu^{(u)}_m}{a}\rho\big)\cos n\varphi,\quad V_{n,m} = \rho J_n\big(\frac{\mu^{(u)}_m}{a}\rho\big)\sin n\varphi, \qquad (21)$$

koje obrazuju dva ortogonalna sistema funkcija, čije su norme određene relacijama:

$$\|V_{n,m}\|^2 = \frac{a^2}{2}(J'_n(\mu^{(u)}_m))^2\pi\varepsilon_n,\qquad \|V_{n,m}\|^2 = \frac{a^2}{2}(J'_n(\mu^{(u)}_m))^2, \qquad (22)$$

gde je $\varepsilon_n = 2$ za $n = 0$, a $\varepsilon_n = 1$ za $n \neq 0$.

Dakle, konačni oblik interfilamentarnog kretanja može se predstaviti relacijom:

$$\Psi(\rho,\varphi,z) = \sum_{m=1}^{\infty}\sum_{n=1}^{\infty}(A_{n,m}V_{m,n}(\rho,\varphi) + B_{m,n}V_{n,m}(\rho,\varphi))Z_{n,m}(z),$$

gde je $Z_{n,m}(z)$ — rešenje jednačine (12).

Kako je traženu funkciju $\Psi(\rho,\varphi,z)$ moguće predstaviti u obliku zbira:

$\Psi_1(\rho,\varphi,z) + \Psi_2(\rho,\varphi,z)$, gde Ψ_1 i Ψ_2 zadovoljavaju granične uslove:

$$\Psi_1|_{\rho=a} = O;\quad \Psi_1|_{z=o} = f(\rho,\varphi);\quad \Psi_1|_{z=l} = 0$$

$$\Psi_2|_{\rho=a} = O;\quad \Psi_2|_{z=o} = 0;\quad \Psi_2|_{z=l} = F(\rho,\varphi); \qquad (24)$$

dovoljno je odrediti funkciju $\Psi_1(\rho,\varphi,z)$. U tom slučaju:

$$Z_{m,n}(z) = sh\frac{\mu^{(u)}_m}{a}(l-z). \qquad (25)$$

Dakle, za $z = O$ dobijamo konturni uslov:

$$\sum_{m=1}\sum_{n=1}(A_{m,n}V_{m,n} + B_{m,n}V_{m,n})sh\frac{\mu^{(u)}m}{a}l = f(\rho,\varphi), \qquad (26)$$

a odavde nalazimo:

$$A = \frac{f_{m,n}}{sh\frac{\mu^{(u)}_m}{a}l},\qquad B = \frac{f_{m,n}}{sh\frac{\mu^{(u)}_m}{a}l}, \qquad (27)$$

gde je:

$$f_{m,n} = \frac{1}{\|V_{m,n}\|^2}\cdot\int_0^{2\pi}\int_0^{\alpha} f(\rho,\varphi)\,.\,V_{m,n}(\rho,\varphi).\rho.\,d\rho.d\varphi,$$

$$f_{m,n} = \frac{1}{\|V_{m,n}\|^2}\cdot\int_0^{2\pi}\int_0^{\alpha} f(\rho,\varphi).V_{m,n}(\rho,\varphi).\rho.\,d\rho.d\varphi, \qquad (28)$$

Prema tome rešenje našeg konturnog problema Schrödingerove jednačine mišićne kontrakcije u zatvorenom cilindričnom polju sarkomere može se prikazati sa:

$$\Psi(\rho,\varphi,z) = \sum_{h=o}^{\infty}\sum_{m=1}^{\infty}(A_{m,n}\cos n\varphi +$$

$$+ B_{m,n} \sin n\varphi) J_n\left(\frac{\mu^{(u)}_m}{a}\rho\right), \frac{sh\frac{\mu^{(u)}_m}{a}(l-z)}{sh\frac{\mu^{(u)}_m}{a}\,.\,l} +$$

$$+ (C_{m,n} \cos n\varphi + D_{m,n} \sin n\varphi) J_n\left(\frac{\mu^{(u)}_m}{a}\rho\right). \frac{sh\frac{\mu^{(u)}_m}{a}, z)}{sh\frac{\mu^{(u)}_m}{a}\,.\,l} \tag{29}$$

gde je: $\mu = a\left(\frac{2m}{h^2}(E-U) + k^2\right)^{1/2}$, (30)

$\mu^{(u)}_m$ je m-ti koren jednačine $J_n(\mu) = 0$, a koeficijenti $A_{m,n}$, $B_{m,n}$, $C_{m,n}$, $D_{m,n}$ su određeni relacijama (27) i (28).

4. PERTURBACIJE SARKOMERE DEJSTVOM SPOLJAŠNJEG ELEKTROSTATIČKOG POLJA

U dosadašnjem izlaganju kretanje našeg mikrosistema smo analizirali uzimajući konstantnu vrednost potencijalne energije okolnog elektrostatičkog polja U. Ukoliko pak potencijalni uticaj okolne sredine posmatramo realnije, kao funkciju položaja i vremena $U(\vec{r}, t)$, onda će se znatno iskomplikovati Hamiltonijan kontraktilnog procesa i Schrödingerova jednačina se neće moći egzaktno rešiti. U tom slučaju smatraćemo da okolina sarkomere vrši perturbaciju kontraktilnog mehanizma. Schrödingerova jednačina ovakvih perturbovanih sistema rešava se određenim aproksimativnim metodama.

Pođimo od opšteg oblika Schrödingerove jednačine:

$$ih \frac{\varphi \Psi}{\varphi t} = H\Psi \tag{1}$$

Ako sa $H^{(\circ)}$ označimo Hamiltonijan primarnog, neperturbovanog stanja sarkomere, a sa λH, perturbacije, onda je Hamiltonijan perturbovane sarkomere određen sa:

$$H = H^{(\circ)} + \lambda H', \tag{2}$$

gde je λ koeficijent razvoja Hamiltonijana u red:

$$H = H^{(\circ)} + \lambda H: + \lambda^2 H'' + \ldots \tag{3}$$

Dakle, Schrödingerova jednačina perturbovanog kontraktilnog procesa ima oblik:

$$ih \frac{\alpha\Psi}{\alpha t} = (H^{(\circ)} + \lambda H')\,\Psi. \tag{4}$$

Nepreturbovana talasna funkcija klasično se definiše relacijom:

$$\Psi_n = \Psi_n . \exp(-i/hE_n t) = \Psi_n . \exp(-iw_n t), \tag{5}$$

pa principom superpozicije dobijamo perturbovanu talasnu funkciju:

$$\Psi = \sum_n c_n(t)\Psi_n = \sum_n c_n(t)\Psi_n \exp(-i)hE_n t). \tag{6}$$

Kada se ovaj izraz za talasnu funkciju zameni u Schrödingerovu jednačinu (4), dobija se:

$$\sum_n i\hbar \frac{d^c n^{(t)}}{dt} \Psi_n \exp(-i/hE_n t) + \sum_n c_n(t) ih \Psi_n (-i/hE_n) \exp(-i/hE_n t). \tag{7}$$

Za određivanje koeficijenata $c_n(t)$ pomnožićemo ovu jednačinu sa Ψ_k^* i integrisati, pa će biti:

$$\sum i\hbar \frac{d^c n}{dt} \int_\tau \Psi^*_k \exp(-i/\hbar E_n t) d\tau =$$

$$= \sum_n c_n \exp(-i/\hbar E_n t) \int_\tau \Psi^*_k \lambda H' \Psi_n d\tau, \tag{8}$$

gde je korišćena relacija: $H^{(\circ)}\Psi_n = E_n\Psi_n$ (9)

za neperturbovano stanje, pa su odgovarajuće sume međusobno poništene.

Uzmimo na levoj strani $n=k$, pa dobijamo:

$$i\hbar \frac{d^c c}{dt} \exp(-i/\hbar E_n t) = \sum_n c_n \exp(-i/\hbar E_n t) \int_\tau \Psi^*_k \lambda H' \Psi_n d\tau \tag{10}$$

jer je za sve $n \neq k$ svaki član u sumi na levoj strani jednak nuli. Odavde sledi:

$$i\hbar \frac{d^c k}{dt} = \sum_n c_n \exp(i/h(E_k - E_n)t) \lambda H'_{kn}. \tag{11}$$

Smenom: $w_{kn} = \frac{E_k - E_n}{\hbar}$ dobijamo:

$$i\hbar \frac{d^c k}{dt} = \sum_n \lambda H'_{kn} c_n \exp(iw_{kn} t), \tag{12}$$

odnosno:

$$\frac{d^c k}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \sum_n \lambda H'_{kn} c_n \exp(iw_{kn} t). \tag{13}$$

Ova jednačina ekvivalentna je Schrödingerovoj za sve vrednosti broja k. Rešava se iterativnim putem i na taj način se odbijaju aproksimativna rešenja za perturbaciju onog reda koji nas interesuje.

Verovatnoća da se kontraktilni sistem u trenutku t nalazi u stanju k, odnosno u stanju sa energijom E_k, određena je sa: $p_k = |c^{(\cdot)}_k(t)|^2$ (14)

gde je na osnovu relacije (13):

$$c_k^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} H'_{kn}/\tau/ \exp(iw_{kn}\tau) d\tau, \tag{15}$$

a gde H'_{kn} predstavlja opšti oblik matrice Hamiltonijana perturbacije sarkomere od strane spoljašnjeg polja.

Matrični elementi perturbacije mogu se pomoću Fourierovog integrala prikazati sa:

$$H'(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} H'(x, w) \exp(-iwt) dw, \tag{16}$$

gde je $H'(x, w)$ određeno sa:

$$H'(x,w) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} H'(x,t) \exp(iwt) dt. \tag{17}$$

Sada jednačina (13) postaje:

$$c'_k/t/ = \frac{1}{ih} . 2\pi . H'_{kn}(w_{kn}) . \quad (18)$$

Odavde, na kraju, dobijamo verovatnoću kvantnog prelaska kontraktilnog procesa iz energetskog stanja n u energetsko stanje k, pod uticajem perturbacije iz spoljašnje sredine, odnosno elektrostatičkog polja aktuelne miofibrile:

$$P_{kn} = \frac{4\pi^2}{h^2} | H'_{kn}(w_{kn}) |^2 . \quad (19)$$

5. Transformacija mišićne energije u kvantnomehanički rad

Da bismo simplificirali kvantnomehaničku interpretaciju mišićnog balansa energije, zanemarićemo transverzalne dimenzije sarkomere, pa će interfilamentarno kretanje biti određeno jednodimenzionom Schrödingerovom jednačinom:

$$\left(-\frac{1}{2}\frac{\alpha^2}{\alpha x^2} - \frac{1}{2m}\frac{\alpha^2}{\alpha l^2} + Fl\right)\Psi(x, l) = E\Psi(x, l) , \quad (1)$$

gde je $x=x(t)$ — veličina preklapanja filamenata, $l=l(t)$ — rastojanje između pokretne i nepokretne Z-linije (trenutna veličina sarkomere), m — masa interaktivnih filamenata..

Sila koja pokreće mobilnu Z-liniju ima konzervativni karakter:

$$F = F(x) = -\frac{\alpha U(x)}{\alpha x} , \quad (2)$$

dakle, suprotna je gradijentu elektrostatičkog potencijala mišićnog tkiva koje okružuje sarkomeru.

Energetski nivoi i talasne funkcije ovako definisanog sistema određeni su respektivno relacijama:

$$E^n_l = \frac{n^2\pi^2}{2l^2} , \quad \Psi^n_l = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\frac{n\pi x}{l} , \quad (3)$$

pri čemu je osnovno-početno stanje kontraktilnog sistema određeno sa n=l, gdje je n=1,2,... — kvantni broj sistema.

Partikularno rešenje jednačine (1) sada tražimo u obliku:

$$\Psi^n_m(x, l) = \Psi^n_m(x) . H^n_m(l) , \quad (4)$$

gde su H^n_m svojstvene vrednosti Hamiltonijana koje moraju zadovoljavati relaciju:

$$\left(-\frac{1}{2m}\frac{\alpha^2}{\alpha l^2} + Fl + \frac{n^2\pi^2}{2l^2}\right) H^n_m(l) = E^h_m H^n_m(l) . \quad (5)$$

Opšte rešenje jednačine (1), odnosno spektar svojstvenog problema energije kontraktilnog procesa, određen je kompletnim skupom talasnih funkcija:

$$\Psi(x, l) = \sum_{k=1} \Psi l^k (x) . H^k(l) . \quad (6)$$

Iz relacije (4) sledi da se kretanje Z-linije vrši u aktivnom potencijalnom polju definisanom sa:

$$U^{(n)}(l) = Fl + \frac{n^2\pi^2}{2l^2} , \quad (7)$$

koje, dakle, zavisi od kvantnog broja sistema i paralelno je krivoj njegove potencijalne energije. Oko svog minimuma (ravnotežni položaj Z-linije) ovaj potencijal se može dovoljno tačno aproksimirati harmonijskim potencijalom, razvijanjem $U^{(n)}(l)$ u Taylorov red i zanemarujući članove trećeg i višeg reda:

$$U^{(n)}(l) \approx Fl_{min} + \frac{n^2\pi^2}{2(l_{min})^2} + \frac{3n^2\pi^2}{(l_{min})^4} . \frac{(l-l_{min})^2}{2} , \quad (8)$$

gde je $l_{min} = \frac{(n^2\pi^2)^{1/3}}{F}$ — položaj minimuma.

Rad koji se vrši u kontraktilnom procesu definisan je relacijom:

$$W = \int_{l_{min}}^{l} Fdx = -\int_{l_{min}}^{l} \frac{\alpha}{\alpha x}\left(Fl + \frac{n^{2}\pi}{2l^2}\right)dx , \quad (9)$$

odnosno, korišćenjem relacije (8):

$$W_{nl} = \left(\frac{n^2\pi^2}{l^3} - \frac{\pi^2}{l_{min}^3}\right) (l-l_{min}) . \quad (10)$$

Energija koja se dobija razlaganjem jednog molekula ATP-a određena je relacijom:

$$\triangle E_{nl} = \frac{\pi^2}{2l_{min}^3}(n^2-1) , \quad (11)$$

pa je efikasnost rada našeg kontraktilnog mehanizma između kvantnih nivoa 1 i h određena relacijom:

$$\Sigma_{nl} = \frac{W_{nl}}{\triangle E_{nl}} = \left(\frac{n^2}{l^3} - \frac{1}{l_{inm}^3}\right) \left((l-l_{min}) \frac{2^{l_{min}}}{n^2-1}\right) , \quad (12)$$

$$\text{odnosno: } \Sigma_{nl} = 2r^2(1-r)\frac{(n^2-1/r^3)}{n^2-1} , \quad (13)$$

ako stavimo: $r = l_{min}/l < 1$.

6. ZAKLJUČAK

Dakle, izvršen je pokušaj kvantnomehaničkog modeliranja jednog od fundamentalnih kinezioloških procesa, procesa kontrakcije skeletnog mišića čovjeka.

Smatramo da je za suštinsko razumevanje ovog fenomena neophodno, s jedne strane vršiti istraživanja na molekularnom nivou, a s druge strane koristiti metode i zakonitosti modernih fizikalnih teorija. Na taj način došli smo do kvantnomehaničkog pristupa u analizi kontraktilnog procesa. Verujemo da se ovim radom otvara put ka sintezi postojećih teorija mišićne kontrakcije. Nadamo se da smo uspeli da damo celishodno objašnjenje biohemijskih, elektrodinamičkih i mehaničkih procesa koji se odvijaju na molekularnom nivou kontraktilnog procesa i impliciraju odgovarajuće pojave na makronivou. Rad je teorijskog karaktera i treba da pruži osnovu eksperimentalnim laboratorijskim istraživanjima iz ove oblasti. Koliko smo u ovoj nameri uspeli pokazaće budućnost.

LITERATURA

1. Blohincev, D. I.: Osnovi kvantovoi mehaniki, Moskva, 1963.
2. Bohm, D.: Quantum Theory, New York, 1952.
3. Bohr, N.: Atomic Phisics and Human Knowledge, New York, 1958.
4. Broglie, L. de: The Current Interpretation of Wave Mechanics, Paris, 1964.
5. Crick, F. H. C.: Of Molecules and Men, Seattle, 1966.
6. Ebashi, S. & Endo, M. (1968). Progress in Biophysics, 18, 123.
7. Elliott, G. F. (1968). J. Theoretical Biology, 21, 71.
8. Fermi, E.: Notes on Quantum Mechanics, Chicago, 1961.
9. Feynman, R. P.: Quantum Electrodinamics, New York, 1961.
10. Gray, B. F. & Gonda, I. (1977). J. Theoretical Biology, 69, 167.
11. Grin, H.: Matričnaja kvantovaja mehanika, Moskva, 1968.
12. Hatze, H. (1977). Biol. Cybernetics, 25, 103.
13. Hatze, H. (1978). Biol. Cybernetics, 28, 143.
14. Hill, A. V.: First and Last Experiments in Muscle Mechanics, Cambridge, 1970.
15. Huxley, A. F. & Niedergerke, R. (1954). Nature, 173, 971.
16. Huxley, A. F. (1957). Progress in Biophisics, 7, 255.
17. Huxley, A. F. (1964). Annual Review of Physiology, 26, 131.
18. Huxley, H. E. (1954). Biochimica et Biophysica acta, 12, 387.
19. Huxley, H. E. Muscle Cells, Newy York, 1960.
20. Huxley, H. E. (1971). Proc. Roy Soc. B, 178, 131.
21. Ivanović, D. M.: Kvantna mehanika, Beograd, 1974.
22. Ivančević, V. (1981). Kineziologija, 2, 1.
23. Jewell, B. R. & Wilkie, D. R. (1960). J. Physiology, 152, 30.
24. Julian, F. J. (1971). Biophysical J., 9, 547.
25. Klotz I. M.: Energetics in Biochemical Reactions, New York, 1957.
26. Landau, L. D. & Lifšic, E. M.: Kvantovaja Mehanika, Moskva, 1963.
27. Lehninger, A. L.: Bioenergetics, the Molecular Basis of Biological Energy Transformations, New York, 65.
28. Nacker, E.: Mechanisms in Bioenergetics, New York, 1965.
29. Shear, D. B. (1970). J. Theoretical Biology, 28, 531

V. Ivancevic; B. Milisic; S. Jaric; P. Gavrilovic

UDC 530.145 : 612.741

A QUANTUM-MECHANICAL MODEL OF MUSCLE CONTRACTION

quantum mechanics / muscle contraction

An attempt was made to obtain a quantum mechanical model of the process of muscle contraction at the molecular level. The formal approach taken should enable a synthesis to be made of current theories of muscle contraction. First, the basic model of the Schrödinger equation for the contractile process in the unperturbed state of the microsystem investigated is presented. Perturbations of a potential nature from the external electrostatic field of the actual myofibril are then included. Finally, energetic transformation and defined criteria for efficiency of muscular work on the quantum mechanical level are analyzed.

Владимир Иванчевич, Бранислав Милишич Предраг Гаврилович Слободан Ярич

КВАНТНОМЕХАНИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ МЫШЕЧНОЙ КОНТРАКЦИИ

В работе сделана попытка квантномеханического моделирования одного из фундаментальных двигательных процесог, т. е. процесса контракции скелтной мышцы у человека. Мы считаем, что для объяснения этой проблемы необходимо, с одной стороны, проводить исследования на уровне молекулы, а, с другой, использовать методы и законы теорий современной физики. Таким способом, мы пришли к применению квантномеханического подхода в анализе процесса контракции. Следует ожидать, что настоящей работой открываются возможности синтеза существующих теорий мышечной контракции. В работе приводятся целесообразные объяснения биохимических, электродинамических и механических процессов, происходящих на молекулярном уровне мышечной контракции и влияющие определенным способом на процессы проходящие на макроуговке. Работа имеет теоретический характер и она должна стать основой экспериментальних лабораторных исследований в этой области. Насколько авторам удалось выполнить эту задачу покажет будущее.